TITLE:

Hubbard横型における磁壁基底状態の厳密解(新奇な秩序を持つ系での相転移,研究会報告)

AUTHOR(S):

糸井, 千岳

CITATION:

糸井, 千岳. Hubbard横型における磁壁基底状態の厳密解(新奇な秩序を持つ系での相転移,研究会報告). 物性研究 2003, 79(5): 838-839

ISSUE DATE:

2003-02-20

URL:

http://hdl.handle.net/2433/97412

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

Hubbard模型における磁壁基底状態の厳密解　日大理工　糸井千岳

磁性体中を伝導する電子が強磁性体の磁壁を通過するとき, 電子は磁壁からどんな影響を受けるかという問題に興味を持ち, 著者はいろいろな模型を調べている. 量子スピン系の模型であるXXZ模型においては, 局在した磁壁を持つ基底状態の厳密解が知られている [1]. そこでは通常のマグノンより低いエネルギーを持った磁壁のまわりにまとわり着く特異なマグノンの存在が数学的に証明されている [2]. また近藤格子上にXXZ模型と伝導電子をのせて, 伝導電子と磁壁の非自明な相互作用が議論されている [3]. 伝導電子と磁壁の相互作用を議論するうえで電子系の模型を考えることが自然であろうという動機から磁壁基底状態を持つ電子系の模型を提案する. ここでは特に強磁性の発現する電子系の模型としてよく知られた平坦バンドHubbard模型を変形して考察する. この模型は田崎により提案され [4], 金属強磁性を理解するうえで鍵を握っていると思われている. この模型ではHamiltonianの運動項のバンドが平坦で, 運動エネルギーを損することなく電子の位置座標の置換に対し反対称な状態がCoulomb反発力が入ったときの基底状態となる. したがって基底状態は電子のスピンの入れ替えに対して対称になり系の合成スピンSが最大の強磁性が出現する. この基底状態はHamiltonianのSU(2)の対称性を自発的に破っていて, とくに粒子数1/4では自明な$2S+1$重縮退をのぞいて基底状態の一意性が示される. また平坦なバンドを曲げることに対する強磁性基底状態の安定性も田崎により証明されている [4]. 今回のこの講演では1次元の平坦バンドHubbard模型をパラメーターqによって変形した模型をしらべる. 格子点x上の電子の生成・消滅演算子を$c^\dagger_{\alpha x}$, $c_{\alpha x}$として次のような演算子を定義する

$$
\begin{aligned}
a_{\uparrow x-1} &\equiv -(q^{1/4})^* c_{\uparrow x-2} + \lambda c_{\uparrow x-1} - (q^{-1/4})^* c_{\uparrow x}, \\
a_{\downarrow x-1} &\equiv -(q^{-1/4})^* c_{\downarrow x-2} + \lambda c_{\downarrow x-1} - (q^{1/4})^* c_{\downarrow x}. \\
d_{\uparrow x} &\equiv q^{-1/4} c_{\uparrow x-1} + \lambda c_{\uparrow x} + q^{1/4} c_{\uparrow x+1}, \\
d_{\downarrow x} &\equiv q^{1/4} c_{\downarrow x-1} + \lambda c_{\downarrow x} + q^{-1/4} c_{\downarrow x+1},
\end{aligned} \tag{1}
$$

$$
n_{\uparrow x} \equiv c^\dagger_{\uparrow x} c_{\uparrow x} \quad n_{\downarrow x} \equiv c^\dagger_{\downarrow x} c_{\downarrow x}, n_x \equiv n_{\uparrow x} + n_{\downarrow x} \tag{2}
$$

これらの間には次の反交換関係が成り立つ

$$
\{a_{\alpha x}, d^\dagger_{\beta y}\} = 0 \quad \alpha, \beta = \uparrow, \downarrow . \tag{3}
$$

系のHamiltonianは

$$
H = H_{\rm hop} + H_{\rm int} \tag{4}
$$

$$
H_{\rm hop} = t \sum_{x=even} (d^\dagger_{\uparrow x} d_{\uparrow x} + d^\dagger_{\downarrow x} d_{\downarrow x}) \tag{5}
$$

$$
H_{\rm int} = U \sum_x n_{\uparrow x} n_{\downarrow x} \tag{6}
$$

このとき変形のパラメーターを$q \to 1$ととればもとの田崎模型に一致する. もとの模型はSU(2)の不変性があるがこの模型ではそれがU(1)に縮小されている. またパリティ$x \to -x$とスピンの第1軸まわりのπ回転$S^{(1)} \to S^{(1)}, S^{(2)} \to -S^{(2)}$, $S^{(3)} \to -S^{(3)}$の合成に対してもHamiltonianは不変に保たれる. 電子はスピン上向きと下向きで飛び移りの振幅が異なるためある種の分子場を感じて飛ぶことに相当している.

このHamiltonianの各項は半正定値$H_{\rm hop} \geq 0$, $H_{\rm int} \geq 0$であるのでエネルギー固有値が0の固有状態は基底状態となる. ある複素数をzとして2重占有がなく, $a^\dagger_{\alpha x}$だけからできている

H_{hop}の固有値ゼロに属する電子数1/4の状態を書き下すことができ, したがって基底状態を厳密に構成することができる. 電子が格子点xに存在するときのスピンが各成分が正となる条件付確率をこの基底状態において計算すると

$$\begin{aligned} Prob\left(S_x^{(1)} = \frac{1}{2} \;\middle|\; n_x = 1\right) &= \frac{1}{2} + \frac{zq^{\frac{x}{2}} + (zq^{\frac{x}{2}})^*}{2(1+|z^2q^x|)} \\ Prob\left(S_x^{(2)} = \frac{1}{2} \;\middle|\; n_x = 1\right) &= \frac{1}{2} - \frac{zq^{\frac{x}{2}} - (zq^{\frac{x}{2}})^*}{2i(1+|z^2q^x|)} \\ Prob\left(S_x^{(3)} = \frac{1}{2} \;\middle|\; n_x = 1\right) &= \frac{1}{1+|z^2q^x|} \end{aligned} \tag{7}$$

となる. したがって$q > 1$が実数であれば十分遠方$x \gg 1/\log q$ でスピンはほぼ下向きであり, もう一方の遠方$x \ll 1/\log q$でスピンはほぼ上向きとなっている. このとき磁壁の中心は$x = -\log|z|$ にサイズ$1/\log q$で局在することがわかる. すなわちこの基底状態はAlcaraz-Salinas-Wreszinskiによって構成された量子スピン系のXXZ模型における平行移動不変性を自発的に破る磁壁基底状態[1]に類似しており, 量子群に似通った対称性の多重項とみることもできる. 講演では, 磁壁の位置をのぞいた基底状態の一意性, バンドを曲げる摂動

$$H'_{\mathrm{hop}} = -s\sum_{x,\sigma} a_{\sigma x}^{\dagger} a_{\sigma x}, \tag{8}$$

に対する磁壁解の安定性, 下の平坦バンドを半分つめて磁壁を作り, 上の平坦ではない伝導バンドに電子をいれたとき電子と磁壁との相互作用がなにをもたらすかを山中-高麗の有効理論[3]にならって議論できることについて述べた.

一方この模型ではqを複素数$q = e^{i\theta}$にとることもできる. このときの横方向のスピンが正である条件付確率に注意すると, ピッチ角θのスパイラル状態が実現していることがわかる. このとき

$$\left\langle \frac{1}{2L+1}\sum_x (\vec{S}_{x-1}\times\vec{S}_{x+1})\cdot\vec{S}_x \right\rangle = \frac{1}{2L+1}\sum_x \langle n_{x-1}n_x n_{x+1}\rangle \sin\theta \tanh\log|z|$$

となり$|z| \neq 1$のときはパリティとスピンの第1軸まわりのπ回転の合成変換の対称性が自発的に破れていることがわかる. 詳しい議論を載せた論文を今執筆中である.

参考文献

[1] F. C. Alcaraz, S. R. Salinas and W. F. Wreszinski, Phys. Rev. Lett. **75** 930 (1995).
[2] T. Koma, B. Nachtergaele and S. Starr, math-ph/0110017.
[3] M. Yamanaka and T. Koma, J. Phys. Soc. Japan, **23** 141 (1999).
[4] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **69** 1608 (1992); **75** 4678 (1995).